數學傳播 48卷4期, pp. 66-72

機率學者看量子力學

謝南瑞

前言: 2025年是聯合國宣佈的國際量子科技年 (IYQST)。量子科技和量子力學的關連密切, 數學者如何看待此事? 或許是個頗有意義的話題吧!?

以下, 僅就一個機率學者的角度, 對量子力學的「早期發展」(也稱爲「舊量子理論」) 作一個介紹。所謂「早期發展」, 通常指 1900 年普朗克發表有關黑體輻射的論文爲始, 而以 1927 年的第五屆 (註: 英文維基百科稱爲第六屆) *Solvay Conference* 爲終。此屆會議的主題是電子和光子, 領導人物爲波爾和愛因斯坦; 與會的 29 人中, 有 17 人曾獲或日後獲諾貝爾獎。

在此文中, 我們以下橫線表示可以在英文或中文維基百科中找到的名詞。又, 爲了讀者方便起見, 我們除了「衆所皆知」的人名用中文外, 其餘皆用英文表達。

有關機率和物理, 特別是相關於統計力學和量子力學的「哲學思想」, 我們推薦參考資料 [3] 的第六講。再, 本文中, 在括號內有「註」字, 則代表作者的加註。

(一) 由古典力學到量子力學

牛頓在 1687 年提出巨著自然哲學的數學原理, 論述牛頓運動定律, 使數學和物理學進入一個「嶄新時代」。經過二百多年的發展, 到了十九世紀末, 據說, 著名的物理學者 Lord Kelvin (William Thomson 1824∼1907) 和 Albert Michelson (1852∼1931, 1907 年獲諾貝爾物理學獎, 以量測光速而知名), 曾發表感嘆, 謂『將沒有主要的物理學研究課題了』(註: 我感謝台大物理學系高涌泉教授提示我這方面的知識)。但是, 隨著普朗克的黑體輻射論述, 加上當時已知的雙狹縫實驗, 這些電子光子等「質量極微小」粒子的波粒二象性,「撼動」了古典力學 (註: 乃至哲學, 甚至神學)。

必須說明的是, 古典物理學中的統計力學 (註:「統計」一詞很容易誤導, 實際上, 是「機率觀點的」才正確; 給我這箴言的, 是楊維哲老師。) 也是研究諸如氣體分子之類的微小粒子的運動, 但是統計力學的所有結論, 都是以所謂「take ensembles」, 即是作「平均」之後得出的「巨觀結論」, 這和波粒二象性這種「個別電子」的行爲截然不同!

(二) 機率和量子力學的關係

首先, 我們釐清, 機率論中的不確定性, 指的是觀測「實存物」而產生的不確定性! 由古

早的丟銅板擲骰子, 而至布朗運動, 即花粉等微小粒子在顯微鏡下的觀測, 乃至於股票期權走勢 $\cdots$ 這些不確定性, 都是「實存物」的不確定性。它們的「運動」都產生「運動軌跡」; 但是, 無法確定的是軌跡究竟 (註: 在沒有「實現」前) 是什麼, 這和天體運動大相庭異。因而, 有機率論的研究和論述出現。

然則, 依照到目前爲止的量子物理學者觀點, 電子光子等, 是「不量測即不存在」! 彼等在由一個「觀測值」到另一個「觀測值」之間, 沒有運動軌跡! 這也是愛因斯坦由量子力學先驅之一變成「不相信」量子力學的主要原因 (註: 我再次謝謝高涌泉教授的提示)。相關的因果律, 有興趣的讀者不妨參考 [3] 。

(三) 量子力學的機率觀點

接受了 (二), 我們現在敘述目前被普遍接受的量子力學之機率觀點; 它是 Max Born (1882～1970) 於 1926 年提出的。Born 在 1954 年因此觀點而獲諾貝爾物理學獎, 是「那個時代」的最後一位獲獎者。

爲了簡明起見, 我們設量子系爲含有 n 個量子態的系統。因此, 其數學架構爲佈於複數系 $\mathbb{C}$ 上的 n 維向量空間, 而每個量子態爲單位長之向量 $\vec{v}=(v_1,\ldots,v_n)$, $\|\vec{v}\|^2=|v_1|^2+\cdots+|v_n|^2=1$。最基本的, 是機率振幅 (*probability amplitude*) 的概念, 由量子態 $\vec{v}$ 躍遷到量子態 $\vec{w}$, 相應的機率振幅是內積 $\langle\vec{v},\vec{w}\rangle=\sum_{i=1}^n v_i\overline{w_i}$ 的平方: $|\langle\vec{v},\vec{w}\rangle|^2$。何以稱爲「機率」? 乃因, $|\langle\vec{v},\vec{w}\rangle|^2\geq 0$, 且,

$$\Big(\Big|\sum_{i=1}^n v_i\overline{w_i}\Big|\Big)^2 \leq \Big(\sum_{i=1}^n |v_i|^2\Big)\Big(\sum_{j=1}^n |w_j|^2\Big)$$
$$=1,$$

上式中之 "$\leq$" 的等號成立, 若且唯若 $\vec{v}=\pm\vec{w}$, 即 $\vec{v},\vec{w}$ 兩者爲同一量子態。

一個可觀測量 (observable), 例如: 雙狹縫實驗中的分光儀, 是一個 n 階自伴 (self-adjoint) 方陣: $A=\big[A_{ij}\big]_{i,j=1}^n$, $A_{ij}\in\mathbb{C}$, $A=\overline{A^t}$, A^t 表 A 的轉置方陣, $-$ 表示取共軛; 亦即,

$$[a_{i,j}]=[\overline{a_{j,i}}].$$

可證明:

若 $\lambda\in\mathbb{C}$ 爲 A 的一個非零特徵值, 即存在某非零 $\vec{v}\in\mathbb{C}^n$ 使 $A\vec{v}=\lambda\vec{v}$ ($\vec{v}$ 作一轉置), 則 λ 必爲實數。

Born 法則: 設可觀測量 A 有 n 個相異的非零特徵值 λ_j, $j=1,\ldots,n$, 每個 λ_j 相應的特徵向量爲 $\vec{v}_j$, 可設 $\vec{v}_j$ 之長度爲 1, 是以其也是一量子態。則, 對每個量子態 $\vec{v}$, 以 A 量測 $\vec{v}$, 必得到某 λ_i, 且量測到 λ_i 的機率是 $|\langle\vec{v},\vec{v}_i\rangle|^2$.

證明: 可證對應於相異特徵值的特徵向量必正交。是以, $\vec{v}_j$, $j=1,\ldots,n$, 構成 $\mathbb{C}^n$ 的一個正規基底。每個量子態 $\vec{v}$ 皆有唯一的線性組合 (疊加) 表法,

$$\vec{v}=\sum_{j=1}^{n}c_j\vec{v}_j,\quad c_j=\langle\vec{v},\vec{v}_j\rangle.$$

左右皆取 A,

$$\begin{aligned}A\vec{v}&=\sum_{j=1}^{n}c_j\big(A(\vec{v}_j)\big)=\sum_{j=1}^{n}c_j(\lambda_j\vec{v}_j)\\&=\sum_{j=1}^{n}(c_j\lambda_j)\vec{v}_j.\end{aligned}$$

上式即代表量測 $\vec{v}$ 獲得 λ_j 的機率為 $|c_j|=|\langle\vec{v},\vec{v}_j\rangle|^2$。 Q.E.D.

我們應了解, 上述的「數學證明」只是在已經完備了的量子力學的數學基礎下之數學陳述; 而後者是在 Dirac 1930 年書以及 von Neumann 1932 年書問世之後才建立 (註: von Neumann 書德文版在 1932 年即問世, 但我們熟知的是 1955 年的英文版)。

(四) 量子力學軼事

以下取材自 [1] 第 14 節。1924 年, Louis de Broglie (1892∼1987, 1929 年諾貝爾物理學獎得主) 提出物質波的理論, 愛因斯坦隨即寫了篇有關此理論的評論, 而薛丁格讀了愛因斯坦之評論。

依薛丁格的思路, 設我們有一粒子 (如一電子), 在一個有位勢 $V=V(t,x)$, $t\geq 0$ 且 $x=(x_1,x_2,x_3)\in\mathbb{R}^3$, 的場中「運動」, 則薛丁格嘗試描述此運動為一個量 $\Psi=\Psi(t,x)$, 而此量循一個波動方程。他設定此量依如下偏微分方程而振動:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+(E-V)\Psi=0.$$

上式中 $\hbar=h/2\pi$, 而 h 是普朗克常數; 又, E 扮演一能量特徵值的角色。在此, $\Delta=\Delta_x$ 為對 x 的 Laplace 算子。

注意: 式 (1) 相似於流體力學中的波動方程, 但是 V 不是常數。薛丁格碰到另一不同處, 而自述:

> 『我的「力學波」, 和流體問題比較起來, 缺少邊界條件。當我研究這些問題時, 我想, 沒有邊界條件是個致命的簡化。我無法想像, 沒有邊界條件, 如何適當地描述振動頻率; 應是我未精通數學吧。』

或許, 我們可以認為, 此時, 薛丁格並沒有脫離「古典架構」; 他設定的式 (1) 並沒有虛單位 i。縱然有這些疑慮, 薛丁格找到了氫原子對應的式 (1) 之特徵值和特徵函數; 於此時 (1) 中

之 $V(t,x)=V(x)=-e^2/r^2$, 而 $r^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2$, $x=(x_1,x_2,x_3)$; 且 $-e$ 表原子核的電荷。他所得到的特徵值, 吻合當時已知的氫原子之離散能階。

有意思的是, 在薛丁格從事其研究不久之前, 海森堡的矩陣力學出現了 (1925年)。海森堡建構了六個無窮矩陣 Q_k 和 P_j; $j,k=1,2,3$; 而 $Q_k=Q_k(t)$, $P_j=P_j(t)$ 滿足如下關係式:

$$P_jQ_k-Q_kP_j=\frac{\hbar}{i}\delta_{jk},$$

對所有 $t\geq 0$ 皆成立; δ_{jk} 表 Kronecker 符號。這些矩陣 P_j,Q_k 是古典力學中的動量和位置的「量子力學對應物」。古典力學中的 Hamiltonian 和 Hamilton 方程式, 海森堡也列出對應的矩陣形式, 且能夠計算出非調和振子 (anharmonic oscillator) 的情況 (註: 這篇 1925 年海森堡的單人論文, 很快地由 Max Born 和 E. Pascual Jordan 增補, 而發展成矩陣力學的三篇基礎論文, 通常稱爲「一人, 二人, 與三人論文」)。

薛丁格看到海森堡的論文, 忍不住地評論如下:

『我的理論, 是由 de Broglie 的論文和愛因斯坦對此論文之評論而啟迪。開始時, 我完全沒有料到我的工作和海森堡之研究的任何關係。我當然知道他的理論; 但是, 我覺得他使用的是困難的超越代數手法, 且缺乏深邃洞見; 甚至可說, 我有些排斥此研究。』

然而, 薛丁格很快地發現兩人的理論是數學一致的, 而且皆與實驗吻合! 即, Q_k 對應到坐標函數 x_k 的乘積算符, 而 P_j 對應到微方算符 $(\hbar/i)\partial/\partial x_j$, $k,j=1,2,3$。這些, 在現今量子力學的教科書是開始教材; 然而, 我們不要忘記, 1920 年代是「混沌時代」。

上述以及之前薛丁格的評論, 出自他一篇 1926 年比較自身工作和矩陣力學關係的論文。此評論出現於論文的註腳, 並沒有列入本文; 或許, 這只代表他的一種心情發抒吧。此論文和其它波動力學的原始論文的英譯版, 出現於 1928 年出版的 *Collected Papers on Wave Mechanics*。

(五) 由隨機力學至量子力學

在 1950∼60 年代, 有一些機率和理論物理的研究者, 主要是 [1] 的作者 Edward Nelson (1932∼2014), 有興趣於利用隨機微分方程來推導一些量子力學的基本結果; 隨機力學 (<u>Stochastic Mechanics</u>) 一詞, 出現於其論文 [2] 中。以下, 主要取材於 [1] 的第 15 節, 且擇取其前面若干節。

假設, 某一微小粒子, 例如電子, 在某種介質 (例如, <u>乙太</u>, 這是一種傳說中「無所不在」的介質, 類似道家中的「氣」。) 游動, 其在時間 $t\geq 0$ 的位置 $x=(x_1,x_2,x_3)\in\mathbb{R}^3$ 爲 $X=X(t,x)$; 且 X 滿足以下的運動方程

$$dX(t)=b(t,X(t))dt+dW(t). \tag{1}$$

以上, b 表此質點的 (平均) 速度場, 而 $W(t)$ 表在空間 $\mathbb{R}^3$ 中的 Wiener 過程 (它是布朗運動的數學模型, 有興趣的讀者或可參考 [6])。

我們假定, 此 Wiener 過程對應的「擴散係數」ϑ 形如

$$\vartheta = \frac{\hbar}{2m},\ m \text{ 爲粒子質量。}$$

於此, 擴散係數一詞是源自 1905 年愛因斯坦的著名論文, 意義如下: 對任意兩時刻 $0 < s < t$, 增量 $W(t) - W(s)$ 獨立於之前的過程 $W(r)$, $0 \le r \le s$, 又, 我們考慮的運動並沒有跳躍, 因之, 數學上可證明, 對每個時刻 $t > 0$, $W(t)$ 的機率密度函數是均值 0 的高斯密度函數

$$\frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{\|x\|^2}{4Dt}}, \quad \|x\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2,$$

$x = (x_1, x_2, x_3)$。常數 D 被愛因斯坦稱爲擴散係數; 我們改以 ϑ 表之。

令 b_* 表 b 的「時間反向」速度場, 且令 a 表「加速度場」

$$a = \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{b + b_*}{2}\Big) + \frac{1}{2}(b \cdot \nabla_x) b_* + \frac{1}{2}(b_* \cdot \nabla_x) b + \vartheta \Delta_x \Big(\frac{b - b_*}{2}\Big).$$

在此, 我們先說明: b 和 a 稱爲速度和加速度, 乃因彼等是符合 (1) 所定出之 $X(t)$ 的對時間 t 之「一次導數二次導數 (微分) 」, 這在 [1] 中已有敘明 (當然, 因 X 爲一個隨機過程, 所以微分必須適當地定義)。

仿古典力學, 我們設所在的場有一外力 F, 且 F 爲某位勢場 $V = V(t, x)$ 所決定: $F = -\nabla_x V$; ∇_x 對 x 的梯度算子。又 F 和 a 滿足 $a = F/m$; m 爲所討論之粒子的質量 (註: 細心的讀者或許會問: 電子是有一微小質量, 但光子是個量子物質, 怎麼沒人討論過它的質量? 正確的答案是: 光子的「靜」質量爲 0, 但它有個「動」質量。)

將上述的各假設代入 $u = \frac{b - b_*}{2}$, 和 $v = \frac{b + b_*}{2}$ 且進行適當的計算, 我們可獲得一個偏微分方程組:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\hbar^2}{2m} \nabla_x (\operatorname{div} v) - \nabla_x (v \cdot u), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = -\dfrac{1}{m} \nabla_x V - (v \cdot \nabla_x) v + (u \cdot \nabla_x) u + \dfrac{\hbar^2}{2m} \Delta_x u. \end{cases} \tag{2}$$

注意: (2) 中, $v \cdot \nabla_x$ 表算子 $v_1 \dfrac{\partial}{\partial x_1} + v_2 \dfrac{\partial}{\partial x_2} + v_3 \dfrac{\partial}{\partial x_2}$, $u \cdot \nabla_x$ 亦然。又 $\Delta_x u = (\Delta_x u_1, \Delta_x u_2, \Delta_x u_3)$。

當給定始值 $u(x, 0)$ 和 $v(x, 0)$, 我們必須解個始值問題; 但 (2) 所定義出的方程組是非線性, 且 (2) 中上下兩方程彼此有關!

此始值問題之解法如下: 令 $X(t)$ 的機率密度函數爲 $\rho=\rho(t,x)$, $t>0$ 且 $x\in\mathbb{R}^3$, 且令

$$R=\frac{1}{2}\ln\rho.$$

可證,

$$\nabla_x R=\frac{m}{\hbar}u.$$

亦即, u 爲 R 的梯度函數。我們設: 有某個 S, 使 v 也是 S 的梯度函數; 且表成

$$\nabla_x S=v.$$

現在, 考慮 $\Psi=\Psi(t,x)$ 定義爲

$$\Psi=e^{R(t,x)+iS(t,x)},\quad t>0 \text{ 且 } x\in\mathbb{R}^3. \tag{3}$$

則可將方程組 (2) 轉化成一個線性偏微分方程式:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=i\frac{\hbar}{2m}\Delta_x\Psi-i\frac{1}{\hbar}V\Psi+i\alpha(t)\Psi. \tag{4}$$

上式中, $\alpha(t)$ 表一個只是時間 t 的函數; 對每個時刻 t, 它是對空間變數 $x\in\mathbb{R}^3$ 爲定值。此 $\alpha(t)$ 來自我們假設 v 爲某個 S 的梯度函數, 亦即 $v(t,x)=\nabla_x S(t,x)$; 由反導數的唯一性, 若有兩個這種 $S_i(t,x)$, 則 $S_1(t,x)=S_2(t,x)+\alpha(t)$, $i=1,2$.

由 $\Psi(t,x)$ 的定義式 (3),

$$\overline{\Psi}(t,x)\Psi(t,x)=e^{2R(t,x)}=\rho(t,x).$$

但 $\rho(t,x)$ 表爲 $X(t)$ 的機率密度函數, 是以,

$$\int_{x\in\mathbb{R}^3}\overline{\Psi}(t,x)\Psi(t,x)dx=1,\qquad \forall\ t>0.$$

上式, 即代表對每個時刻 $t, x\to\overline{\Psi}(t,x)\Psi(t,x)$, $x\in\mathbb{R}^3$, 爲一個機率密度函數, 即 $\Psi(t,x)$ 爲一個機率振幅。讀者可參考第 (三) 節, 機率振幅的概念。

當我們取 $\alpha(t)=0$ 時, (4) 即爲一般量子力學教材中出現的薛丁格方程式。

結語: 在本文中, 我們論述了兩個機率和量子力學的關連。Max Born 所提出的量子力學機率觀點, 現在早已是相關教科書的基礎教材。Edward Nelson 所提的利用隨機過程來討論量子力學, 似乎沒有物理學者的迴響。然則, 我們仍可以說, 機率的概念及手法, 仍是物理學者的基本數學方法之一; 例如, Max Born 在他的 1954 年諾貝爾獎受獎演說 [5] 中, 就引用了遷移機率 (transition probability); 這在他 1926 年的原始論文 [4] 中, 並沒有出現; 當然, 在 1920 年

代, 機率論本身也在發展成形期。在 1935 年的 EPR 悖論以及 1964 年的 Bell 不等式, 和之後發展出來的量子糾纏 (quantum entanglement) 理論, 機率也扮演一個基本角色。

另一方面, 若干機率學者, 發展量子機率論, 著重於量子算符的非可交換性。美國數學會的數學主題分類, 也將量子理論列爲主題之一。機率論中的一些著名研究, 例如隨機漫步和布朗運動, 在「量子化」之後, 和古典情形的對比, 也是目前機率學者的興趣所在。

參考文獻

1. Edward Nelson, *Dynamical Theories of Brownian Motion*, Princeton University Press 1967.
2. Edward Nelson, *Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics*, Physical Review 1966.
3. Richard von Mises, *Probability, Statistics and Truth*, Dover Publications, 1981.
4. Max Born, *Quantum mechanics of collision processes*, 1926 (Translation from German original).
5. Max Born, *The statistical interpretation of quantum mechanics*, Nobel lecture 1954.
6. 謝南瑞。若干機率論與分析學的關連與互動。數學傳播季刊, 16(4), 84-93, 1992。

—本文作者爲台灣大學數學系退休教授—